

# 利用 B 样条神经网络控制聚合物相对分子质量分布新方法

吴海燕 曹柳林

(北京化工大学信息科学与技术学院, 北京 100029)

**摘 要:** 文中利用 B 样条神经网络可以逼近连续函数的良好性质, 构造合适的网络模型从而得到相对分子质量分布模型的线性表示方法, 根据最优化方法中的梯度法, 求得最优控制序列。应用在苯乙烯聚合反应的仿真实验中, 收到了很好的控制效果, 证明了方法的可行性。

**关键词:** 相对分子质量分布; 控制; 神经网络

**中图分类号:** TQ311

相对分子质量分布是聚合物分子特性之一, 是决定聚合产品加工性能和质量的重要指标<sup>[1]</sup>。以相对分子质量分布作为控制目标与其他被控过程不同, 其输出不是一个或一组变量形式, 而是以链长 (聚合物单体个数) 为自变量的一组高关联性的函数。由于相对分子质量分布的这种性质, 仍然缺乏有效的相对分子质量分布在线测量和控制手段。目前可行的控制策略往往是对相对分子质量分布的特征参数如平均相对分子质量<sup>[2]</sup>或相对分子质量分布的矩<sup>[1]</sup>等实施控制。Timothy 等使用状态估计的方法计算合理长度的重基相对分子质量分数, 利用非线性规划方法计算反应温度的次最优控制序列, 以实现相对分子质量分布控制的目标<sup>[3]</sup>。Ellis 等基于卡尔曼滤波原理提出了在线测量和控制 MWD 的方法<sup>[2]</sup>, Scali 等提出通过控制间歇反应釜的温度分布, 控制平均相对分子质量和 MWD 的分散指数的方法<sup>[4]</sup>。

本文在利用神经网络获得相对分子质量分布模型的基础上, 使用最优化方法计算控制策略, 最终控制相对分子质量分布。以苯乙烯聚合为例, 实现了闭环仿真。研究结果证明了本方法的可行性。

## 1 相对分子质量分布建模

B 样条神经网络是以 B 样条函数作为基函数的

网络形式<sup>[5]</sup>。由于基函数有一些特殊性质, B 样条神经网络也具有一些特殊性<sup>[6]</sup>。例如由于 B 样条函数的紧密性, 使得 B 样条神经网络成为典型的局部逼近神经网络: 对输入空间的某个区域, 只有少数几个连接权需要调整, 这样的网络具有学习速度快的优点。B 样条神经网络是基于样条插值原理设计的网络, Girosi<sup>[7]</sup>等人的研究表明使用 B 样条神经网络可以逼近任意的连续函数。

利用 B 样条神经网络可建立相对分子质量分布的模型, 其网络结构如图 1 所示。

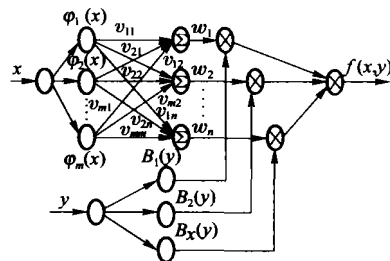


图 1 网络结构图

Fig. 1 Architecture of network

建模过程利用两个 B 样条神经网络的叠加<sup>[8]</sup>, 两个 B 样条函数  $\phi_j(x)$ , ( $j = 1, \dots, m$ ) 和  $B_i(y)$ , ( $i = 1, \dots, n$ ) 作为基函数, 实现从控制变量  $x$  和分子链长  $y$  到相对分子质量分布  $f(x, y)$  的映射。

以在实验室规模的 CSTR (连续搅拌釜式反应器) 中进行的苯乙烯聚合反应为仿真对象。以物流比率作为控制变量。聚苯乙烯相对分子质量分布函数  $f(x, y)$  是定义在链长  $y$  上、随物流比率  $x$  变化的函数。其中  $x \in [0.3, 0.7]$ ,  $y \in [1, M]$ ,  $M$  是链

收稿日期: 2004-06-18

第一作者: 女, 1980 年生, 硕士生

E-mail: wuhy@mail.buct.edu.cn

长的最大取值,文中定为 2000。从网络结构图中看到

$$f(x, y) = \sum_{i=1}^n w_i(x) B_i(y) \quad (1)$$

$$w_i(x) = \sum_{j=1}^m v_{ji} \phi_j(x) \quad (2)$$

$w_i, v_{ji}$  分别是两个 B 样条网络的待训练参数,其中  $w_i$  是定义在链长  $y$  上网络的参数,  $v_{ji}$  则是定义在物流比率  $x$  上网络的参数。将公式(2)代入(1)中,相对分子质量分布函数可以表示成

$$f(x, y) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m v_{ji} \phi_j(x) B_i(y) \quad (3)$$

$B_i(y), \phi_j(x)$  分别是定义在链长  $y$  和物流比率  $x$  取值域上的样条函数,在确定了样条函数的阶次和内插点个数后,两函数的输出只由输入唯一确定。 $v_{ji}$  是待训练的权因数,共  $n \times m$  个。至此,(3)式已经将相对分子质量分布函数转化为权因数的线性形式,利用递推最小二乘法可对网络进行训练,进而得到权因数的值达到建立数学模型的目的。

## 2 相对分子质量分布控制

### 2.1 控制策略推导

控制策略的选择是基于模型的算法。把系统实际的输入和输出数据送入 B 样条神经网络,经离线训练和学习,建立起满足精度要求的数学模型。在闭环控制中,神经网络给出预估的相对分子质量分布,它与给定的理想分布相比较,使用最优化方法,计算出使性能指标  $J_1$  为最小的控制策略。

选取相对分子质量分布的控制指标为

$$J_1 = \int_1^M (f(x, y) - g(y))^2 dy \quad (4)$$

$g(y)$  是给定的理想分布。以系统输出分布与给定分布之间的误差平方和最小为控制目标,选取合适的控制序列,令输出分布尽可能接近给定分布,即令  $J_1$  最小。

根据最优化方法中的梯度法,使(4)式值最小的控制变量  $x$  应该满足

$$x_{t+1} = x_t - \mu \left. \frac{\partial J_1}{\partial x_t} \right|_t \quad (5)$$

$\mu > 0$ , 是加权因数,  $t$  是采样时刻。

为求取关键的灵敏度函数  $\frac{\partial J_1}{\partial x}$ , 由式(1)分布函数  $f(x, y)$  可以写成

$$f(x, y) = B(y) W(x)$$

$$B(y) = (B_1(y), B_2(y), \dots, B_n(y))$$

$$W(x) = (w_1(x), w_2(x), \dots, w_n(x))^T$$

则系统性能指标可表示为

$$J_1 = \int_1^M [B(y) W(x) - g(y)]^2 dy$$

从而灵敏度函数  $\frac{\partial J_1}{\partial x}$  等于

$$\frac{\partial J_1}{\partial x} = 2 \int_1^M [B(y) W(x) - g(y)] B(y) \frac{\partial W(x)}{\partial x} dy$$

观察上式,  $J_1$  对  $x$  的偏导最终转化为  $W$  对  $x$  的偏导,考虑  $W$  是由  $w_i$  组成的向量,  $B(y)$  是由  $B_i$  组成的向量,由式(2)看到,其中每一个分量对输入的导数为

$$\frac{\partial w_i}{\partial x} = \sum_{j=1}^m v_{ji} \frac{\partial \phi_j}{\partial x}$$

由于  $\phi_j$  是标准 B 样条函数,上式的求解可以通过对样条函数的微商获得。从样条函数的定义可以推得其微商为

$$\frac{\partial [\phi_{j,k}(x)]}{\partial x} = \frac{k}{x_{j+k} - x_j} \phi_{j,k-1}(x) - \frac{k}{x_{j+k+1} - x_{j+1}} \phi_{j+1,k-1}(x)$$

$\phi_{j,k}$  表示阶次为  $k$  的第  $j$  个 B 样条函数,  $x_j$  表示输入变量第  $j$  个内插点的值,这种表示方法很容易在计算机上实现。由此求得的灵敏度函数值代入(5)式中,可以求解出使相对分子质量分布接近理想分布的控制策略。

综上所述,控制系统的结构如图 2 所示。 $f(x,$

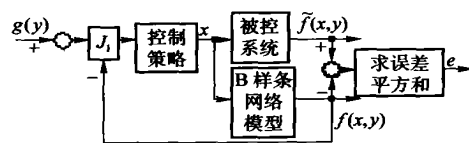


图 2 控制系统结构

Fig. 2 Structure of the control system

$y)$  表示实际被控系统的输出,其与模型之间的误差平方和用  $e$  表示,通过  $e = \int_1^M (f(x, y) - f(x, y))^2 dy$  计算得到。

### 2.2 控制结果

利用上述结果对苯乙烯聚合反应进行控制的仿真试验,以物流比率做为控制变量。对输入  $x$  和链长  $y$  的 B 样条函数内插点个数均为 8,阶次均为 4。系统稳定状态下,改变给定分布,观察控制器调节作

用,如图 3 所示。

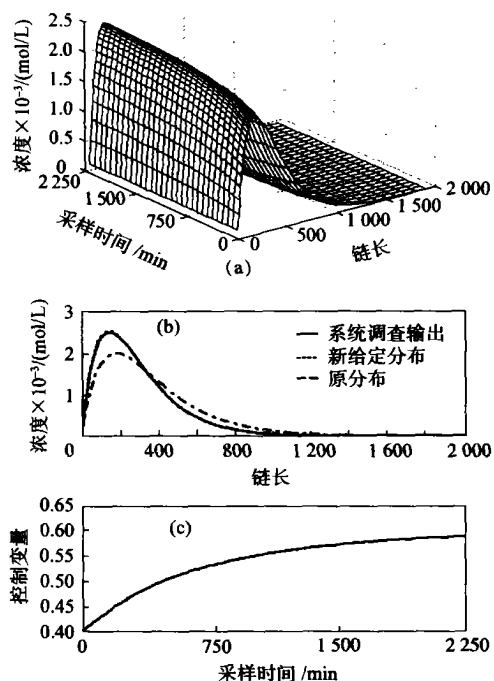


图 3 控制结果

Fig. 3 Outcomes of the control system

控制器运行 150 次采样时间,系统输出变化过程如图 3(a)。可以看到,改变了给定分布后,通过控制器的调节,系统输出重新逼近给定分布,比较结果如图 3(b)所示,图 3(c)是控制变量的变化情况。

### 3 结 论

本文研究了控制相对分子质量分布的新方法,构造合适的 B 样条神经网络,经离线训练和学习,建立起满足精度要求的数学模型。由神经网络给出预估的相对分子质量分布,与给定的理想分布相比

较,使用最优化方法,计算出使性能指标  $J_1$  为最小的控制策略。并以实验室规模的苯乙烯聚合反应为仿真模型,验证此方法的控制效果,证明了其可行性。

为了研究方便,本文所采用的是物流比率单变量作为控制变量。由于神经网络可以很容易的扩展到多变量系统,因此本文提出的方法也可以很容易的推广到多变量系统中,使控制手段更加丰富,满足更高的控制要求。

### 参 考 文 献

- [1] Vicente M, Benamor S, Gugliotta L M. Control of molecular weight distribution in emulsion polymerization using online reaction calorimeter [J]. *Indus and Eng Chem Res*, 2001, 40(1): 218 - 227
- [2] Ellis M F, Taylor T W, Jensen K F. Online molecular weight distribution estimation and control in batch polymerization[J]. *AIChE Journal*, 1994, 40(3): 445 - 462
- [3] Timothy J. Crowley, Kyu YongChoi. Discrete optimal control of MWD in a batch free radical polymerization process[J]. *Ind Eng Chem Res*, 1997, 36: 3676 - 3682
- [4] Scali C, Ciari R, Bello T, et al. Optimal temperature for the control of the product quality in batch polymerization: Simulation and experimental results[J]. *Journal of Applied Polymer Science*, 1995, 55(6): 945 - 959
- [5] 程正兴,李水根. 数值逼近与常微分方程数值解[M]. 西安:西安交通大学出版社,2000,88 - 98
- [6] 孙增圻. 智能控制理论与技术[M]. 北京:清华大学出版社,广西:广西科学技术出版社,1997,163 - 169
- [7] Grosi F, Poggio T. Networks and the best approximation property[J]. *Biol Cybern*, 1990, 163: 169 - 176
- [8] Wang H. Bounded dynamic stochastic distributions modelling and control [M]. London: Springer-Verlag Ltd, 2000, 17 - 38

## Control of molecular weight distribution of polymerization via B-spline neural networks

WU Hai-yan CAO Liu-lin

(College of Information Science and Technology, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

**Abstract:** The characteristics of B-spline functions and the structure of B-spline neural networks was introduced and a new way was presented to build the neural networks and to get a linear express of molecular weight distribution. An optimization algorithm based on the linear express was used to calculate the optimal control sequences. A new control procedure was utilized on a simulated object and a well control led result was got that demonstrated the feasibility of this new way.

**Key words:** molecular weight distribution; control; neural network

(责任编辑 刘同帅)